

## عنوان مقاله:

مقاله پژوهشی: بررسی پارامترهای ساختاری و ساختار نواری InAs در دو فاز بلندروی و ورتسایت

## محل انتشار:

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران، دوره 10، شماره 2 (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

## نویسندگان:

حمدا.. صالحی - دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

صغری بهرامی ده تونی - دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

## خلاصه مقاله:

در این مقاله، پارامترهای ساختاری از جمله ثابت‌های شبکه، مدول حجمی و مشتق آن، پایداری و ساختار نواری ترکیب InAs در دو فاز بلندروی و ورتسایت بررسی شده است. محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با روش شبه‌پتانسیل باریایسته توسط بسته نرم‌افزاری اسپرسو انجام شده است. نتایج به دست آمده و از جمله مقادیر ثابت شبکه محاسبه شده با نتایج تجربی در سازگاری خوبی هستند. نتایج بیان‌گر آن است که فاز بلندروی پایدارتر است و InAs در هر دو فاز، نیم‌رسانایی با شکاف کوچک است. همچنین، نتایج حاصل از مشارکت اربیتال‌های مختلف نشان می‌دهد که در نوار رسانش همپوشانی قوی بین اربیتال‌های p از اتم‌های In و As و اربیتال s از اتم In است، در حالی که در بالای نوار ظرفیت همپوشانی اربیتال‌های p از اتم‌های In و As غالب است.

## کلمات کلیدی:

InAs، نظریه تابعی چگالی، کوانتوم اسپرسو، شبه‌پتانسیل

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1172320>

